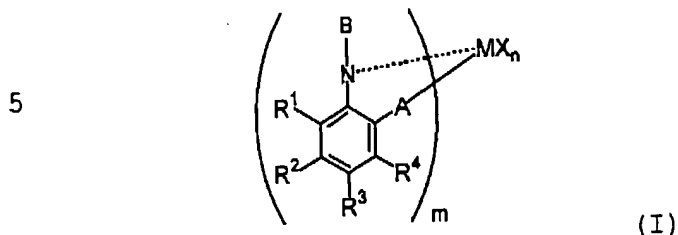




JP-A-11-199592

Claim 1.

A transition metal compound represented by the following formula (I):



wherein:

M is a transition metal atom of Groups 3 to 11 of the
10 periodic table,

m is an integer of 1 to 6,

A is an oxygen atom, a sulfur atom, or a selenium atom,
or a nitrogen atom having a substituent $-R^5$,

B is a substituent for N and represents $-R^9$ and $-R^{10}$, or
15 $=C(R^{11})R^{12}$,

R^1 to R^{12} may be the same or different and independently
represent a hydrogen atom, a halogen atom, a hydrocarbon group,
a heterocyclic compound residual group, an oxygen-containing
group, a nitrogen-containing group, a boron-containing group,
20 a sulfur-containing group, a phosphorus-containing group, a
silicon-containing group, a germanium-containing group or a
tin-containing group, two or more of which may be bonded to
each other to form a ring except for the case where R^1 and R^9 ,
or R^1 and R^{10} are bonded to each other to form an aromatic ring,

when m is 2 or greater, one group of R^1 to R^{12} contained in one ligand and one group of R^1 to R^{12} contained in other ligands may be bonded together,

R^1 s, R^2 s, R^3 s, R^4 s, R^5 s, R^6 s, R^{10} s, R^{11} s and R^{12} s may be
5 the same or different,

n is a number satisfying a valence of M, and

X is a hydrogen atom, a halogen atom, a hydrocarbon group, an oxygen-containing group, a sulfur-containing group, a nitrogen-containing group, a boron-containing group, an
10 aluminum-containing group, a phosphorus-containing group, a halogen-containing group, a heterocyclic compound residual group, a silicon-containing group, a germanium-containing group or a tin-containing group, and when n is 2 or greater plural groups indicated by X may be the same or different and
15 may be bonded to each other to form a ring.

Example 5 [0232]

To a 500-ml glass autoclave thoroughly purged with nitrogen, 250 ml of toluene was introduced, and the liquid phase
20 and the gas phase were saturated with ethylene at 100 l/hr. Thereafter, 0.25 mmol of triisobutylaluminum (TIBA), and subsequently 0.005 mmol of the compound (C-3) and 0.006 mmol of triphenylcarbenium tetrakis(pentafluorophenyl)borate (TrB) were added to initiate polymerization.

The polymerization was carried out at 25°C for 1 hour in an ethylene gas atmosphere at atmospheric pressure, and then terminated by adding a small amount of isobutanol. After the polymerization was completed, the reaction product was introduced into a large amount of methanol to precipitate a whole amount of polymer. Then, hydrochloric acid was added, and the mixture was filtered through a glass filter. The resultant polymer was vacuum dried at 80°C for 10 hours to obtain 0.03 g of polyethylene (PE), which had an intrinsic viscosity (η) of 5.0 dl/g. The polymerization activity was 12 g/mmol-V·hr.

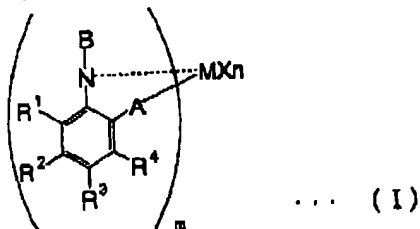
Example 7 [0234]

Under the same conditions as in Example 5, polymerization was initiated by adding 0.005 mmol of the compound (A-4), and was carried out at 25°C for 30 minutes in an ethylene gas atmosphere at atmospheric pressure. As a result of the same post-treatment as in Example 1, 0.25 g of polyethylene (PE) was obtained. The polymerization activity was 100 g/mmol-Ti·h, and the intrinsic viscosity (η) of the polyethylene was 8.3 dl/g.

【特許請求の範囲】

【請求項1】 下記一般式(I)で表わされる遷移金属化合物；

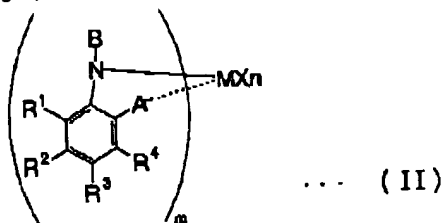
【化1】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～6の整数を示し、Aは、酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基-R⁵を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として、-R⁶および-R⁷、または=C(R¹¹)R¹²を示し、R¹～R¹²は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく(R¹とR¹⁰またはR¹とR¹⁰が連結して芳香環を形成するものは除く)、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれるR¹～R¹²のうちの1個の基と、他の配位子に含まれるR¹～R¹²のうちの1個の基とが結合されていてもよく、R¹同士、R²同士、R³同士、R⁴同士、R⁵同士、R⁶同士、R⁷同士、R⁸同士、R⁹同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【請求項2】 下記一般式(II)で表わされる遷移金属化合物；

【化2】

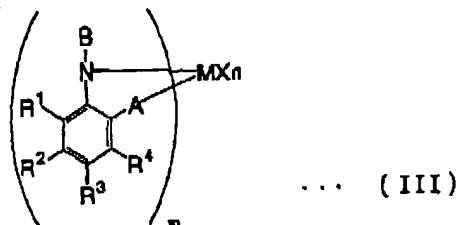


(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～6の整数を示し、Aは、結合基-R⁵を有する酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、

結合基として、-R⁶および-R⁷、または=C(R¹¹)R¹²を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として-R⁸を示し、R¹～R⁹は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれるR¹～R⁹のうちの1個の基と、他の配位子に含まれるR¹～R⁹のうちの1個の基とが結合されていてもよく、R¹同士、R²同士、R³同士、R⁴同士、R⁵同士、R⁶同士、R⁷同士、R⁸同士、R⁹同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、アルミニウム含有基、リン含有基、ハロゲン含有基、ヘテロ環式化合物残基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基またはスズ含有基を示し、nが2以上の場合には、Xで示される複数の基は互いに同一でも異なってもよく、またXで示される複数の基は互いに結合して環を形成してもよい。)

【請求項3】 下記一般式(III)で表わされる遷移金属化合物；

【化3】



(式中、Mは、周期律表第3～11族の遷移金属原子を示し、mは、1～3の整数を示し、Aは、酸素原子、イオウ原子、セレン原子、または、結合基として-R⁵を有する窒素原子を示し、Bは、Nの結合基として-R⁸を示し、R¹～R⁹は、互いに同一でも異なってもよく、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、ヘテロ環式化合物残基、酸素含有基、窒素含有基、ホウ素含有基、イオウ含有基、リン含有基、ケイ素含有基、ゲルマニウム含有基、またはスズ含有基を示し、これらのうちの2個以上が互いに連結して環を形成していてもよく、また、mが2以上のときは、一つの配位子に含まれるR¹～R⁹のうちの1個の基と、他の配位子に含まれるR¹～R⁹のうちの1個の基とが結合されていてもよく、R¹同士、R²同士、R³同士、R⁴同士、R⁵同士、R⁶同士は互いに同一でも異なってもよく、nは、Mの価数を満たす数であり、Xは、水素原子、ハロゲン原子、炭化水素基、酸素含有基、イオウ含有基、窒素含有基、ホウ

-Ti·hrであり、得られたポリエチレンの極限粘度 $[\eta]$ は9.1dl/gであった。

【0231】(実施例4) 実施例1と同様の条件下、化合物(B-2)を0.005mmol加え重合を開始した。常圧のエチレンガス雰囲気下、25℃で30分間反応させた後、実施例1と同様の後処理を行ったところ、ポリエチレン(PE)を0.10g得た。重合活性は40g/mmol-Zr·hrであり、得られたポリエチレンの極限粘度 $[\eta]$ は3.3dl/gであった。

【0232】(実施例5) 十分に窒素置換した内容積500mlのガラス製オートクレーブにトルエン250mlを装入し、液相および気相をエチレン100リットル/hrで飽和させた。その後、トリイソブチルアルミニウム(TIBA)を0.25mmol、引き続き化合物(C-3)を0.005mmol、トリフェニルカルベニウムテトラキス(ペンタフルオロフェニル)ボレート(TrB)を0.006mmol加え重合を開始した。常圧のエチレンガス雰囲気下、25℃で1時間反応させた後、少量のイソブタノールを添加することにより重合を停止した。重合終了後、反応物を大量のメタノールに投入してポリマーを全量析出させた後、塩酸を加えてガラスフィルターで濾過した。ポリマーを80℃にて10時間減圧乾燥した後、ポリエチレン(PE)を0.03g得た。重合活性は12g/mmol-V·hrであり、極限粘度 $[\eta]$ は5.0dl/gであった。

【0233】(実施例6) 実施例1と同様の条件下、化合物(A-4)を0.005mmol加え重合を開始した。常圧のエチレンガス雰囲気下、25℃で60分間反応させた後、実施例1と同様の後処理を行ったところ、ポリエチレン(PE)を0.62g得た。重合活性は124g/mmol-Ti·hrであり、得られたポリエチレンの極限粘度 $[\eta]$ は18.3dl/gであった。

【0234】(実施例7) 実施例5と同様の条件下、化合物(A-4)を0.005mmol加え重合を開始した。常圧のエチレンガス雰囲気下、25℃で30分間反応させた後、実施例1と同様の後処理を行ったところ、ポリエチレン(PE)を0.25g得た。重合活性は100g/mmol-Ti·hrであり、得られたポリエチレンの極限粘度 $[\eta]$ は8.3dl/gであった。

【0235】(実施例8) 実施例1と同様の条件下、化合物(A-4)を0.005mmol加え重合を開始した。常圧のエチレンガス雰囲気下、25℃で30分間反応させた後、実施例1と同様の後処理を行ったところ、ポリエチレン(PE)を0.03g得た。重合活性は12g/mmol-Zr·hrであり、得られたポリエチレンの極限粘度 $[\eta]$ は7.6dl/gであった。

【0236】(実施例9) 十分に窒素置換した内容積500mlのガラス製オートクレーブにトルエン250mlを装入し、液相および気相をエチレン100リットル/hrで飽和させた。その後、トリイソブチルアルミニウム(TIBA)を0.25mmol、引き続き化合物(C-3)を0.005mmolを加え重合を開始した。常圧のエチレンガス雰囲気下、25℃で30分間反応させた後、少量のイソブタノールを添加することにより重合を停止した。重合終了後、反応物を大量のメタノールに投入してポリマーを全量析出させた後、塩酸を加えてガラスフィルターで濾過した。ポリマーを80℃にて10時間減圧乾燥した後、ポリエチレン(PE)を0.03g得た。重合活性は12g/mmol-Co·hrであり、得られたポリエチレンの極限粘度 $[\eta]$ は3.1dl/gであった。

【図面の簡単な説明】

【図1】 本発明に係るオレフィン重合用触媒の調製工程を示す説明図である。